فصل II : الحقل الصامدة دورانيا
(Les systèmes invariants par rotation)

في هذا الفصل ندرس الحقل التي تتحرك داخل كمونات من الشكل :

$$V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|) = V(r)$$

$$\Delta = \Delta_{radial} + \Delta_{angulaire}$$

$$\Delta V(r) = \Delta_{radial} V(r).$$

فيما يلي تشتغل في فضاء له ثلاثة أبعاد ونستعمل الإحداثيات الكروية
معادلات القيم الذاتية للهاملتونيان :

$$H \phi_E(r,\theta,\varphi) = E \phi_E(r,\theta,\varphi).$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r)$$

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla})^2 + V(r).$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] + V(r)$$

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}\right] + V(r)$$

نلاحظ أن :

$$\frac{\hbar^2}{2mr^2}\Delta_{\theta,\varphi} = -\frac{1}{2mr^2} L^2$$

إذن

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Delta_r - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}\right] + V(r)$$

نلاحظ أن : $[H, L^2] = 0$ وهذا نتيجة للصمود الدوراني
نستنتج كذلك أن H و L^2 لهما مجموعة مشتركة من الدوال الذاتية

$$H \phi_E(r,\theta,\varphi) = E \phi_E(r,\theta,\varphi)$$

$$L^2 Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

$$L^2 \phi_E(r,\theta,\varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) \phi_E(r,\theta,\varphi).$$

$$\phi_E(r,\theta,\varphi) = f(r)\, Y^m(\theta,\varphi).$$

وعادة نكتب:

$$\phi_{Elm}(r,\theta,\varphi) = R_{Elm}(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

إذن:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}\right] + V(r)\right\} R_{Elm}(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi) = E\, R_{Elm}(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

ومنه:

$$\boxed{\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] + V(r)\right\} R_{Elm}(r) = E\, R_{Elm}(r)}$$

هذه المعادلة تصف حركة قطرية مركزية

ليكن:

$$R_{Elm}(r) = \frac{U_{El}(r)}{r}$$

ومنه:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] + V(r)\right\} \frac{U_{El}(r)}{r} = E\, \frac{U_{El}(r)}{r}$$

أو

$$\boxed{\left\{\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right] - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right\} U_{El}(r) = 0}$$

الحد $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$ يمثل حاجز كموني طارد.

ليكن المؤثر:

$$D_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}}_{V_{eff}}$$

و D_l يمثل هاملتوني لجملة تتحرك تحت تأثير الكمون الفعلي V_{eff} من 0 إلى $+\infty$.

يجب أن يكون D_l هرميتي

$$\int_0^\infty U_1^*(D_l U_2)\,dr = \int_0^\infty \left[U_2^*(D_l U_1)\right]^* dr = \int_0^\infty (D_l U_1)^* U_2\,dr$$

$$\Rightarrow \int_0^\infty \left[U_1^*(r)\left(D_l U_2(r)\right) - U_2(r)\left(D_l U_1(r)\right)^*\right] dr = 0$$

$$\int_0^\infty \left[U_1^*(r)\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}U_2'' + V U_2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}U_2\right) - U_2\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2}\right)^+ U_1^* + V U_1^* + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}U_1^*\right)\right] dr = 0$$

$$\int_0^\infty \left[U_1^* U_2'' - U_2 U_1^{*''}\right] \overset{?}{=} 0$$

$$U_1^* U_2'' = \frac{d}{dr}\left(U_1^* U_2'\right) - U_1^{*'} U_2'$$

$$U_2 U_1^{*''} = \frac{d}{dr}\left(U_2 U_1^{*'}\right) - U_2' U_1^{*'}$$

$$\boxed{\left(\frac{d}{dr}\right)^+ = -\frac{d}{dr} \quad \text{ضد هرميتي}}$$

$$\boxed{\left(\frac{d^2}{dr^2}\right)^+ = \frac{d^2}{dr^2} \quad \text{هرميتي}}$$

إذن:

$$\int_0^\infty \frac{d}{dr}\left[U_1^* U_2' - U_2 U_1^{*'}\right] \overset{?}{=} 0$$

$$\Rightarrow \left(U_1^* U_2' - U_2 U_1^{*'}\right)\Big|_0^\infty \overset{?}{=} 0$$

ومن شرط تقنين على $R_{El}(r)$

$$\int_0^\infty r^2 dr\, |R_{El}(r)|^2 = 1$$

$$\Rightarrow \int_0^\infty |U_{El}(r)|^2\, dr = 1$$

. الخواص العامة لـ $U_{El}(r)$:

* $r\to 0$: $\frac{1}{r^2}\gg V(r)$

$\frac{1}{r^2}\gg E$

إذن يبقى في المعادلة التي يحققها $U_{El}(r)$:

$$U''_{El} = \frac{l(l+1)}{r^2}\,U_{El}$$

$$U''_{l} = \frac{l(l+1)}{r^2}\,U_{l} \quad (\text{نلاحظ غياب } E)$$

لنأخذ الحل من الشكل :

$$U_l \sim r^{\alpha}$$

$$\Rightarrow \alpha(\alpha-1) = l(l+1)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \alpha_1 = l(l+1) \\ \alpha_2 = -l \end{cases}$$

$$\boxed{\Rightarrow U_l(r) = \begin{cases} r^{l+1} & (\text{Régulières}) \\ \frac{1}{r^l} & (\text{Singulières}) \end{cases}}$$

نلاحظ أن الحل الثاني لا يحقق الشرط $U_l(0)=0$ إلا إذا كان $l=0$ (لا يوجد دوران).

. نعتبر الحل المقبول :

$$U_l(r)\sim r^{l+1}$$

عندما l يتزايد نلاحظ أن الجسيم يبتعد عن المبدأ o كل هذه الاعتبارات صحيحة لما $l\neq 0$.

. نتحصل على التعيين على Δ عندما :

$\lim_{r\to 0} U_{El}(r) = 0$ (الحالات المرتبطة)

. نتحصل على التعيين على $\delta(r)$ عندما :

$U_{El}(r)\sim e^{ikr}$ (حالات الجيوب)

وفي الحالتين :

$$\left(U_1^{*} U_2' - U_2 U_1^{*\prime}\right)\Big|_0 = 0$$

$$\Rightarrow \frac{U_1^{*\prime}(0)}{U_1^{*}(0)} = \frac{U_2'(0)}{U_2(0)}$$

$$\Rightarrow \lim_{r\to 0} U_{El}(r)\sim C$$

* $C\neq 0$: $\Leftarrow R_{El}(r)\sim \frac{C}{r}$

عندما $r\to 0$ نلاحظ أن $R_{El}(R)$ متباعد . لكن هذا ليس مشكلا لأن :

$$\int_0^{\infty} r^2 |R_{El}(r)|^2 dr \simeq \int_0^{\varepsilon} r^2 \frac{|C|^2}{r^2} dr + \int_{\varepsilon}^{\infty} r^2 |R_{El}(r)|^2 dr$$

$$= |C|^2\varepsilon + \int_{\varepsilon}^{\infty} r^2 |R_{El}(r)|^2 dr$$

إذن :

$$\phi_E(r,\theta,\varphi) = \frac{C}{r}\,Y_l^m$$

وهذا الحل لا يحقق معادلة Schrodinger بجوار $r=0$ لأن :

$$\Delta\left(\frac{1}{r}\right) = -4\pi\,\delta^3(\vec r)$$

ومن هذه النتيجة نستنتج أن $C=0$ ومنه $\boxed{\lim_{r\to 0} U_{El}(r)=0}$

أما عند حدود ميدان الحل الكلي يتعلق ويعتمد على شكل الكمون $V(r)$.

* $r \to \infty$:

نفرض أن الكمون $V(r) \neq 0$، في هذه الحالة:

$$V(r) >> \frac{1}{r^2}$$

وعندها:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(V(r) - E\right)\right] U_{El}(r) = 0$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(V(r) - E\right)\right] r R_{El} = 0$$

• ندرس صنف من الكمونات المحققة

$$rV(r) \xrightarrow[r \to \infty]{} 0$$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E\right) r R_E(r) = 0$$

$$\frac{d^2}{dr^2} U_E(r) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} E \, U_E(r)$$

نضع: $k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E$

$$U_E'' + k^2 U_E = 0$$

$$\begin{cases} U_E(r) = A e^{ikr} + B e^{-ikr} \\ 0 < r < \infty \end{cases}$$

حيث:

$$k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$$

من شكل الحل $(e^{\pm ikr})$ نستنتج أن الجسيم أصبح حرا بعيدا عن المبدأ. (حالات حيود)

(états de diffusion)

نبرر لماذا اشترطنا $rV(r) \xrightarrow[r \to \infty]{} 0$

وليس $V(r) \xrightarrow[r \to \infty]{} 0$ ؟.

* لدينا:

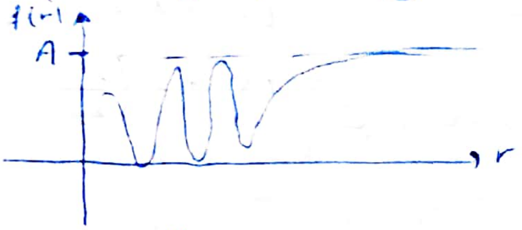
$$U_E(r) = f(r) e^{\pm ikr}$$

نعوض في معادلة Schrodinger :

$$f'' \pm (2ik) f' + \frac{2\mu V(r)}{\hbar^2} f = 0$$

• عندما $r \to \infty$ فإن $f(r) \to cte$

ومنه نقول أن $f(r)$ تتغير ببطء



إذن:

$$f''(r) = 0$$

$$\frac{df}{f} = \mp \frac{i\mu}{k\hbar^2} V(r) \, dr$$

$$f(r) = f(r_0) \, e^{\mp \frac{i\mu}{\hbar^2 k} \int_{r_0}^{r} V(r) \, dr}$$

• نعتبر حالة ذرة الهيدروجين:

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

$$f(r) = f(r_0) \, e^{\pm \frac{i\mu e^2}{\hbar^2 k} \ln\left(\frac{r}{r_0}\right)}$$

$$f(r) = f(r_0) \left(\frac{r}{r_0}\right)^{\pm \frac{ie^2\mu}{\hbar^2 k}}$$

ومنه:

$$U_E(r) \sim \left(\frac{r}{r_0}\right)^{\pm \frac{ie^2\mu}{k\hbar^2}} e^{\pm ikr}$$

نلاحظ أن الإلكترون لن يكون حرا من الكمون الكولوني.

عندما $r \to \infty$ نتحصل على تصحيحات صغيرة الا عندما

$$r\,V(r) \xrightarrow[r\to\infty]{} 0$$

في الحالات الأخرى فالتصحيحات ليست صغيرة عند $r \to \infty$

مثال:

$$V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

$$\int_{r_0}^{r} V(r)\,dr = \frac{1}{6}\mu\omega^2(r^3-r_0^3)$$

$$f(r) = f(r_0)\exp\left[\mp \frac{i\mu^2\omega^2}{6k\hbar^2}(r^3-r_0^3)\right]$$

$$U_E(r) \underset{r\to\infty}{\sim} e^{\pm ik\left[r-\left(\frac{\mu\omega}{\hbar k}\right)^2(r^3-r_0^3)\right]}$$

• نعتبر الحالة:

$E<0$ و $r \to \infty$

$$k \to ik$$

$$k = \sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}}$$

$$U_E''(r) - k^2 U_E(r) = 0$$

$$U_E(r) = Ae^{-kr} + Be^{kr}$$

عندما: $V(r) = \frac{-e^2}{r}$ نتحصل على

$$U_E(r) \underset{r\to\infty}{\sim} (r)^{\pm\frac{\mu e^2}{\hbar^2 k}}\, e^{\mp kr}$$

تطبيقات:

I) الجسيم الحر: $V(r)=0$

نضع $k=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)U_{El}(r)=0$$

نقسم الطرفين على k^2 ونستعمل المتغير الجديد $\rho = kr$

$$\left(\frac{d^2}{d(kr)^2}+1-\frac{l(l+1)}{(kr)^2}\right)U_{El}(r)=0$$

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2}+1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)U_{El}(\rho)=0$$

نبحث عن الحلول $U_{El}(\rho)$ باستعمال الطريقة الجبرية.

نعرف مؤثرين للهدم والبناء:

$$\boxed{\begin{aligned} d_l^+ &= -\frac{d}{d\rho}+\frac{l+1}{\rho} \\ d_l &= +\frac{d}{d\rho}+\frac{l+1}{\rho} \end{aligned}}$$

$$(d_l^+ d_l)U_{El} = \left\{-\frac{d^2}{d\rho^2}-\frac{d}{d\rho}\left(\frac{l+1}{\rho}\right)+\frac{l+1}{\rho}\frac{d}{d\rho}+\frac{(l+1)^2}{\rho^2}\right\}U_{El}$$

$$= -\frac{d^2}{d\rho^2}U_{El}-\frac{d}{d\rho}\left[\frac{l+1}{\rho}U_{El}\right]+\frac{l+1}{\rho}\frac{d}{d\rho}U_{El}+\frac{(l+1)^2}{\rho^2}U_{El}$$

$$= -\frac{d^2}{d\rho^2}U_{El}+\frac{l+1}{\rho^2}U_{El}+\frac{(l+1)}{\rho}U'_{El}$$

$$-\frac{l+1}{\rho}U'_{El}+\frac{(l+1)^2}{\rho^2}U_{El}$$

$$= -\frac{d^2}{d\rho^2} U_{El} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}(1+l+1)\, U_{El}$$

$$= \left[-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] U_{El} + \frac{2(l+1)}{\rho^2} U_{El}$$

$$= U_{El} + \frac{2(l+1)}{\rho^2} U_{El}$$

$$\Rightarrow \boxed{(d_l^+ d_l)\, U_{El} = U_{El} + \frac{2(l+1)}{\rho^2} U_{El}}$$

نبرهن كذلك أن :

$$\boxed{d_l d_l^+ U_l = U_l}$$

نضرب الطرفين في d_l^+

$$d_l^+ (d_l d_l^+ U_l) = d_l^+ U_l$$

$$d_l^+ d_l (d_l^+ U_l) = 1(d_l^+ U_l)$$

نلاحظ أن $(d_l^+ U_l)$ هو شعاع ذاتي لـ $d_l^+ d_l$ بالقيمة الذاتية 1

نستعمل العلاقة التالية

$$d_l^+ d_l = d_{l+1} d_{l+1}^+$$

إذن : $d_{l+1} d_{l+1}^+ (d_l^+ U_l) = (d_l^+ U_l).$

ولدينا : $d_{l+1} d_{l+1}^+ U_{l+1} = U_{l+1}$

ومن هتين العلاقتين نستنتج

$$U_{l+1} = C_l\, d_l^+ U_l$$

نختار : $C_l = 1$. فإننا نستطيع امتصاص هذا المعامل في معامل تقنين التابع الموجي

$l = 0$: معادلة Schrodinger في هذه الحالة هي :

$$\frac{d^2}{d\rho^2} U_l + U_l = 0$$

(وهي تمثل معادلة هزاز توافقيا حيث أن مربع التردد يساوي 1).

حلول هذه المعادلة هي :

$U_0^B = -\cos\rho$, $U_0^A = \sin\rho$

الحل العام هو :

$$U_0 = A U_0^A + B U_0^B$$

* هل U_0^A و U_0^B تحققان الشرط

$$\lim_{r\to 0} U_l(r) = 0$$

لدينا : $\lim_{\rho\to 0} U_0^B = -1$ et $\lim_{\rho\to 0} U_0^A = 0$

نلاحظ أن $U_0^B(\rho)$ حل غير مقبول

ومنه : $U_0(r) = A\sin(kr)$

$l \neq 0$: لدينا :

$$U_{l+1} = d_l^+ U_l$$

نستعمل التوابع R_l :

$$\rho R_{l+1} = \left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho}\right)\rho R_l$$

$$R_{l+1}\rho = \left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho}\right)\rho R_l$$

$$= \rho^l \left(-\frac{d}{d\rho}\right)\frac{R_l}{\rho^l}$$

$$\frac{R_{l+1}}{\rho^l} = \left(-\frac{d}{d\rho}\right)\frac{R_l}{\rho^l}$$

$$\boxed{\frac{R_{l+1}}{\rho^{l+1}} = \left(-\frac{1}{\rho}\cdot\frac{d}{d\rho}\right)\frac{R_l}{\rho^l}}$$

اذن:

$$\frac{R_{l+1}}{\rho^{l+1}} = \left(-\frac{1}{\rho}\cdot\frac{d}{d\rho}\right)\left(-\frac{1}{\rho}\cdot\frac{d}{d\rho}\right)\frac{R_{l-1}}{\rho^{l-1}}$$

$$= \left(-\frac{1}{\rho}\cdot\frac{d}{d\rho}\right)^2\left(-\frac{1}{\rho}\cdot\frac{d}{d\rho}\right)\frac{R_{l-2}}{\rho^{l-2}}$$

$$= \left(-\frac{1}{\rho}\cdot\frac{d}{d\rho}\right)^{l+1}\cdot\frac{R_0}{\rho^0}$$

$$\boxed{R_l = \rho^l\left(-\frac{1}{\rho}\cdot\frac{d}{d\rho}\right)^l R_0}$$

ونكتب:

$R_l^A = j_l$: دوال Bessel الكروية من الرتبة l

$R_l^B = n_l$: دوال Newman الكروية من الرتبة l

• فيما يلي بعض الخواص:

$$\begin{cases} n_0(\rho) = -\dfrac{\cos\rho}{\rho} \\ n_1(\rho) = -\dfrac{\cos\rho}{\rho^2} - \dfrac{\sin\rho}{\rho} \\ n_2(\rho) = -\left(\dfrac{3}{\rho^3} - \dfrac{1}{\rho}\right)\cos\rho - \dfrac{3\sin\rho}{\rho^2} \end{cases}$$

$$\begin{cases} j_0(\rho) = \dfrac{\sin\rho}{\rho} \\ j_1(\rho) = \dfrac{\sin\rho}{\rho^2} - \dfrac{\cos\rho}{\rho} \\ j_2(\rho) = \left(\dfrac{3}{\rho^3} - \dfrac{1}{\rho}\right)\sin\rho - \dfrac{3\cos\rho}{\rho^2} \end{cases}$$

$$j_l \xrightarrow[\rho\to\infty]{} \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)$$

$$j_l \xrightarrow[\rho\to 0]{} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}$$

$$n_l \xrightarrow[\rho\to\infty]{} -\frac{1}{\rho}\cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)$$

$$n_l \xrightarrow[\rho\to 0]{} -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}$$

(طيف الطاقة مستمر)

بالنسبة لدوال Neuman فهي غير مقبولة فيزيائيا لأنها لا تحقق الشرط $\lim\limits_{\rho\to 0} u_l(\rho) = 0$.

• نكتب الآن التابع الموجي للجسيم الحر:

$$\psi_{Elm}(\vec{r}) = R_{El}(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

$$= j_l(kr)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

ونحقق:

$$\int \psi_{Elm}(\vec{r})\,\psi^*_{El'm'}(\vec{r})\,d\vec{r}$$

$$= \int \psi_{Elm}(\vec{r})\,\psi^*_{El'm'}(\vec{r})\,r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$= \frac{2}{\pi k^2}\,\delta(k-k')\,\delta_{ll'}\,\delta_{mm'}$$

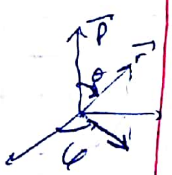
حيث استعملنا العلاقة التالية:

$$\int_0^\infty j_l(kr)\, j_{l'}(k'r)\, r^2 dr = \frac{2}{\pi k^2}\,\delta(k-k')\,\delta_{ll'}$$

* ما هي علاقة عبارة (FPL) مع الموجات المستوية في 3 أبعاد

Sond part libre

$$\psi_E(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$



$$\frac{1}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r} = \frac{1}{\hbar}\, p\, r\cos\theta$$

$$\psi_E(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{ikr\cos\theta}$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} D_l^m\, \psi_{Elm}(r,\theta,\varphi)$$

$$= \sum_{l=0}\sum_{m=-l}^{l}$$

3 ـ الهزاز التوافقي 2D و 3D

* الهزاز التوافقي المتجانس 3.D

$$V(x,y,z) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 (x^2+y^2+z^2)$$
$$= \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

الهملتوني في 3-D :

$$H_{OH} = \frac{P_x^2+P_y^2+P_z^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2(X^2+Y^2+Z^2)$$

$$H_{OH} = \frac{\vec{P}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2\vec{R}^2$$

الهدف هو حل معادلة القيم الذاتية التالية :

$$H_{OH}|\psi_{Elm}\rangle = E_{Elm}|\psi_{Elm}\rangle$$

$$H_{OH}\psi_{Elm}(\vec{r}) = E_{Elm}\psi_{Elm}(\vec{r})$$

حيث :

$$|\psi_{Elm}\rangle = \int d\vec{r}\,\psi_{Elm}(\vec{r})|\vec{r}\rangle$$

نلاحظ أن V تتعلق فقط بطويلة r

إذن :

$$\psi_{Elm}(\vec{r}) = R_{El}(r)\,Y_l^m(\theta,\varphi)$$
$$= \frac{U_{El}(r)}{r}\,Y_l^m(\theta,\varphi)$$

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{1}{2}\mu\omega^2r^2 - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]\right\}U_{El} = 0$$

* $r \to \infty$:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^2 r^2\right]U_{El} = 0$$

نضع : $y = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\,r$

$$\Rightarrow r = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}\,y$$

$$\frac{d}{dr}U_{El} = \frac{d}{dy}U_{El}\cdot\frac{dy}{dr}$$

$$\boxed{b(y) = y^{l+1}\sum_{n=0}^{\infty} C_n y^n}$$

نحسب b' و b'' :

$$b' = (l+1)\, y^{l} \sum_{n=0}^{\infty} C_n y^n + y^{l+1} \sum_{n=0}^{\infty} n C_n y^{n-1}$$

$$b'' = l(l+1)\, y^{l-1} \sum_{n=0} C_n y^n + (l+1)\, y^{l} \sum_{n=0} n C_n y^{n-1} + (l+1)\, y^{l} \sum_{n=0} n C_n y^{n-1} + y^{l+1} \sum_{n=0} n(n-1) C_n y^{n-2}$$

$$= l(l+1)\, y^{l-1} \sum_{n=0} C_n y^n + 2(l+1)\, y^{l+1} \sum_{n=2} n C_n y^{n-2} + y^{l+1} \sum_{n=0} n(n-1) C_n y^{n-2}$$

$$= l(l+1)\, y^{l-1} \sum_{n=0} C_n y^n + 2(l+1) \sum (n+2) C_{n+2} y^n$$

بالتعويض في المعادلة نجد :

$$\sum_{n=0}^{\infty} y^{l+1} \Big\{ \left[2(l+1)(n+1) + (n+1)(n+1)\right] \times C_{n+2} - \left[2n + 2(l+1) - (2\lambda - 1)\right] C_n \Big\} \cdot y^n = 0$$

اذن :

$$\left[2(l+1)(n+1) + (n+1)(n+2)\right] C_{n+2} = \left[2n + 2(l+1) - (2\lambda - 1)\right] C_n$$

اذن :

$$\frac{C_{n+2}}{C_n} = \frac{2n + 2(l+1) - (2\lambda - 1)}{2(l+1)(n+1) - (n+1)(n+2)}$$

$$\frac{d}{dr} U_{El} = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\, \frac{d}{dy} U_{El}$$

$$\frac{d^2}{dr^2} U_{El} = \frac{d}{dr}\left(\frac{d}{dr} U_{El}\right) = \frac{d}{dr}\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\right)\left(\frac{d}{dy} U_{El}\right) = \frac{\mu\omega}{\hbar}\, \frac{d}{dy}\left(\frac{d}{dy} U_{El}\right) \frac{dy}{dr}$$

$$\frac{d^2}{dr^2} U_{El} = \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right) \frac{d^2}{dy^2} U_{El}$$

اذن :

$$\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right) \frac{d^2}{dy^2} U_{El} - \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right) y^2 U_{El} = 0$$

$$\Rightarrow \left[\frac{d^2}{dy^2} - y^2\right] U_{El} = 0$$

ومنه :

$$U_{El} \sim e^{-y^2/2}$$

ومنه نضع :

$$\boxed{U_{El}(y) = b(y)\, e^{-y^2/2} \qquad 0 < r < \infty}$$

اذن يبقى حساب $b(y)$ ، نعوضها في معادلة schrodinger (تمرين)

$$\begin{cases} b''(y) - 2y\, b'(y) + \left[(2\lambda - 1) - \dfrac{l(l+1)}{y^2}\right] b(y) = 0 \\ \lambda = \dfrac{E}{\hbar\omega} \end{cases}$$

من الدراسة العامة نعرف أن

$$U_{El}(r) \xrightarrow[r \to 0]{} r^{l+1}$$

اذن نضع :

إذن في الحالتين :

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left[N + \frac{3}{2}\right]}$$

* ماهي القيم الممكنة لـ l ؟

① $N = 2k' + l$

$\Rightarrow l = N - 2k'$

$l = N, N-2, N-4, \ldots$

* $N = 2k' + 1 + l$

$\Rightarrow l = N - 2k' - 1$

$l = N-1, N-3, N-5$

$$\boxed{l = N, N-1, N-2, \ldots 1; 0}$$

لنكتب بعض الحالات :

$\psi_{Elm}(\vec{r}) = \psi_{Nlm}(\vec{r})$

* $m=0 \;.\; l=0 \;,\; N=0$

* $m=0 \;.\; l=0 \;,\; N=1$

$m = 0, \pm 1, \quad l = 1$

$\cancel{m=0} \;,\; \cancel{l=0} \;:\; \cancel{N=2}$

• نرجع الآن إلى التوابع الموجية

$\psi_{Nlm}(\vec{r}) = R_{Nl}(\vec{r})\, Y_l^m(\theta, \varphi)$

$\psi_{Nlm}(\vec{r}) = \frac{U_{Nl}}{r}\, Y_l^m(\theta, \varphi)$

لدينا :

$U_{Nl}(y) = e^{-\frac{y^2}{2}}\, b(y)$

$U_{Nl}(y) = y^{l+1} e^{-\frac{y^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} C_n y^n$

$$\frac{C_{n+2}}{C_n} = \frac{2n + (2l+1) - (2\lambda - 1)}{(n+2)\left[(2l+1) + (n+1)\right]}$$

* نعرف أن :

$\lim_{r \to \infty} V(r) = \infty$

$\Leftarrow$ مقدار منتهي $\lim_{y \to \infty} b(y) =$

$\lim_{n \to \infty} \frac{C_{n+2}}{C_n} = \frac{2}{n}$

إذن يوجد $n = k$ بحيث

$\frac{C_{k+2}}{C_k} = 0$

$\Rightarrow C_{k+2} = 0$: (زوجي) : $k = 2k'$ *

$C_{2k'+2} = 0$

$\Rightarrow 2k + (2l+1) = 2\lambda - 1$

$\Rightarrow 2k + (2l+1) = 2\frac{E}{\hbar\omega} - 1$

$E_{nl} = \frac{\hbar\omega}{2}\left[2k + 2l + 3\right]$

$$\boxed{E_{nl} = \hbar\omega\left[\underbrace{2k' + l}_{N} + \frac{3}{2}\right]}$$

نربط هذه العبارة بالطيف في بعد واحد :

$E_{nl} = \hbar\omega\left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\left(n_y + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\left(n_z + \frac{1}{2}\right)$

$N = n_x + n_y + n_z$

(k فردي) : $k = 2k' + 1$ *

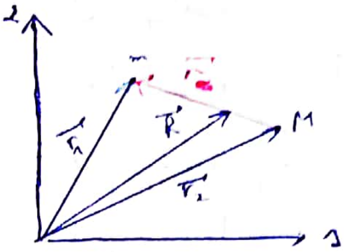
$C_{2k'+3} = 0$

$$\boxed{E = \hbar\omega\left[2k' + 1 + l + \frac{3}{2}\right]}$$

ذرة الهيدروجين :

$$e^- \; m \bullet \!\!- \bullet M$$

$$\mu = \frac{mM}{m+M}$$



$$\begin{cases} m\vec{r}_1 + M\vec{r}_2 = (m+M)\vec{R} \\ \vec{r}_2 - \vec{r}_1 = \vec{r} \end{cases}$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} m & M \\ -1 & 1 \end{vmatrix} = m+M$$

$$\vec{r}_1 = \frac{\begin{vmatrix} (m+M)\vec{R} & M \\ \vec{r} & 1 \end{vmatrix}}{m+M} = \frac{(m+M)\vec{R} - M\vec{r}}{m+M}$$

$$\vec{r}_2 = \frac{\begin{vmatrix} m & (m+M)\vec{R} \\ -1 & \vec{r} \end{vmatrix}}{m+M} = \vec{R} + \frac{m}{m+M}\vec{r}$$

هملتوني الجملة :

$$H = \frac{\vec{P}_1^{\,2}}{2m} + \frac{\vec{P}_2^{\,2}}{2M} + V_1(\vec{r}_1) + V_2(\vec{r}_2) + \cancel{V(\ldots)} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

$$= \frac{m}{2}\left(\dot{\vec{R}} - \frac{M}{m+M}\dot{\vec{r}}\right)^2 + V_1(\vec{R},\vec{r}) + \frac{M}{2}\left(\dot{\vec{R}} + \frac{m}{m+M}\dot{\vec{r}}\right)^2 + V_2(\vec{R},\vec{r}) + V(|\vec{r}|)$$

$$H = \frac{m+M}{2}\dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2}(mM^2 + Mm^2)\frac{\dot{\vec{r}}^2}{(m+M)^2} + V_1(\vec{R},\vec{r}) + V_2(\vec{R},\vec{r}) + V(r)$$

$$= \frac{m+M}{2}\dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2}\frac{mM}{m+M}\dot{\vec{r}}^2 + V(r)$$

$$H = \frac{1}{2}M_{tot}\dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2}\mu\dot{\vec{r}}^2 + V(r)$$

$\frac{1}{2}M_{tot}\dot{\vec{R}}^2$: الطاقة حركة جسيم كتلته M_{tot} (حركة حرة) يمكن إهمالها.

$\frac{1}{2}\mu\dot{\vec{r}}^2 + V(r)$: ~~الطاقة~~ حركة كتلته μ يتحرك داخل الكمون $V(r)$.

نعتبر ذرة الهيدروجين :

$$\frac{m_e}{M_p} \simeq \frac{1}{2000}$$

أي أن $M_p >> m_e$

أي أن الإلكترون هو الذي يتحرك في مجال البروتون. إذن الطاقة الكامنة للإلكترون في الحقل الكولومبي للبروتون هي :

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

ومنه : نكتب هملتوني الجملة

$$H = \frac{\hat{P}^2}{2\mu} + V(|\hat{r}|)$$

$$H = \frac{\hat{P}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\hat{r}|}$$

نعتبر معادلة القيم الذاتية

$$H|\psi_{Elm}\rangle = E|\psi_{Elm}\rangle$$

في تمثيل الإحداثيات :

$$\langle\vec{r}|H|\psi_{Elm}\rangle = E\langle\vec{r}|\psi_{Elm}\rangle$$

$$H\,\psi_{Elm}(r,\theta,\varphi) = E\,\psi_{Elm}(r,\theta,\varphi)$$

لدينا : $V(|\vec{r}|) = V(r) = -\frac{e^2}{r}$

إذن نفصل الحركة القطرية عن الحركة الزاوية.

$$\psi_{\ell m}(r,\theta,\varphi) = R_{E\ell}(r)\, Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \frac{U_{E\ell}(r)}{r} Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

و:

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + \frac{e^2}{r} - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]\right\} U_{E\ell} = 0$$

أولا نعتبر الحالة: $r \to \infty$

$$U_{E\ell} \xrightarrow[r\to\infty]{} \exp\left(-r\sqrt{\frac{2\mu W}{\hbar^2}}\right)$$

$W = -E$ هي الطاقة اللازمة لتحرير الإلكترون.

ثانيا: $r \to 0$

$$U_{E\ell} \xrightarrow[r\to 0]{} r^{\ell+1}$$

نضع $\boxed{\rho = \sqrt{\frac{2\mu W}{\hbar^2}}\cdot r}$

ونضع:

- $U_{E\ell} = e^{-\rho}\, b_{E\ell}(\rho)$

نعوض في معادلة Shrodinger

$$\left[\frac{d^2 b}{d\rho^2} - 2\frac{db}{d\rho} + \frac{e^2\lambda}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right] b = 0 \quad (*)$$

حيث: $\boxed{\lambda = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2 W}}}$

ليكن:

- $b(\rho) = \rho^{\ell+1}\sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k$

بعد التعويض في $(*)$ نجد:

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} = \frac{-e^2\lambda + 2(k+\ell+1)}{(k+\ell+2)(k+\ell+1) - \ell(\ell+1)}$$

نلاحظ أن:

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} \xrightarrow[k\to\infty]{} \frac{2}{k}$$

وهذه النهاية تشبه نهاية الدالة $\rho^m e^{2\rho}$

$$\rho^s e^{2\rho} = \rho^s \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(2\rho)^k = \rho^s \sum_{k=0}^{\infty} D_k \rho^k$$

$$D_k = \frac{2^k}{k!}$$

$$\frac{D_{k+1}}{D_k} = \frac{2^{k+1}}{(k+1)!}\frac{k!}{2^k} = \frac{2}{k+1} \xrightarrow[k\to\infty]{} \frac{2}{k}$$

إذن:

$$b \underset{\rho\to\infty}{\sim} \rho^s e^{2\rho}$$

نطلب من السلسلة أن تتوقف عند k كيفي.

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} = 0$$

$$\Rightarrow c_{k+1} = 0$$

$$e^2\lambda = 2(k+\ell+1)$$

$$\boxed{E_n = -W_n = \frac{-me^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = k+\ell+1}$$

$n = 1, 2, 3, \dots$

نعرف أن: $k = 0, 1, 2, \dots$

إذن:

$$\ell = n-k-1$$

$$\ell = n-1, n-2, \dots, 0$$

الكتابة الطيفية:

$\ell = 0 \longrightarrow$ الحالات s

$\ell = 1 \longrightarrow$ الحالات p

$l=2 \longrightarrow$ الحالة d

$l=3 \longrightarrow$ " f

$l=4 \longrightarrow$ " g

* نكتب بعض حالات ذرة الهيدروجين:

• $n=1$ ، $l=0$ ، $m=0$

$$\psi_{100} = \psi_{1s}$$

• $n=2$: $l=0$, $m=0$ $\quad \psi_{200} = \psi_{2s}$

$l=1$ $\quad m=0,\pm1$

$$\left.\begin{matrix}\psi_{210} \\ \psi_{21\pm1}\end{matrix}\right\} = \psi_{2p}$$

• $n=3$, $l=0$ $\quad m=0$ $\quad \psi_{3s}$

$l=1$ $\quad m=0,\pm1$ $\quad \psi_{3p}$

$l=2$ $\quad m=0,\pm1,\pm2$ $\quad \psi_{3d}$

* ما هي درجة الإنحلال ؟

$$\boxed{g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2}$$

نلاحظ أن الحالات بقيم مختلفة للعدد الكمي المداري l مخالفة زيادة على الإنحلال الناتج عن القيم المختلفة لـ m . ونعرف أن هذا الإنحلال الأخير ناتج عن الصمود الدوراني للجملة.

يبقى إذن البحث عن الصمود الإضافي الذي يؤدي إلى الإنحلال لقيم مختلفة لـ l .

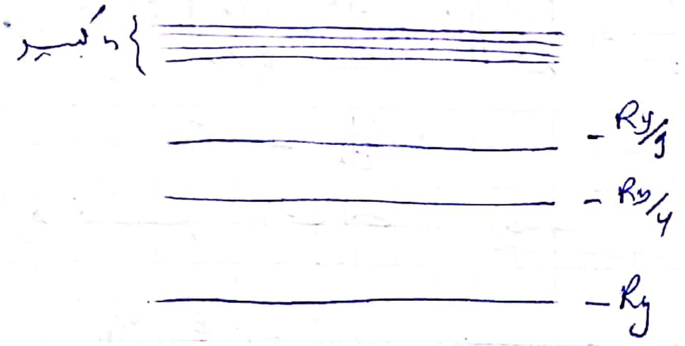
* لنتحول الآن وحدة طبيعية لكتابة طيف الطاقة :

نعرف الريدبارغ بـ :

$$R_y = \frac{m e^4}{2\hbar^2}$$

ومنه :

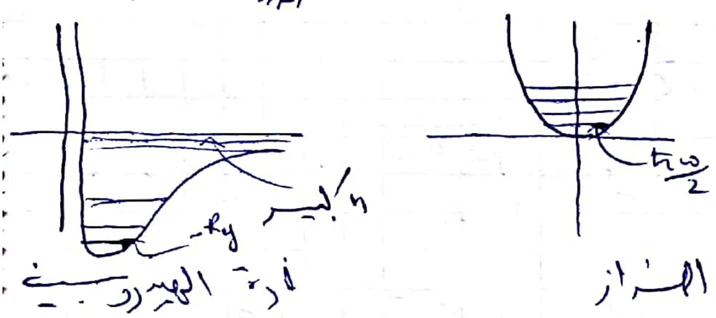
$$E_n = -\frac{R_y}{n^2}$$



n كبير إذن $\Delta E \longrightarrow 0$ كأن E_n أصبح مستمرا.

لنقارن مع الهزاز التوافقي.

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$$



. التوابع الموجية :

$$\frac{C_{k+1}}{C_k} = \frac{-e^2\lambda + 2(k+l+1)}{(k+l+2)(k+l+1) - l(l+1)}$$

نعبر عن أن التوابع الموجية القطرية

$$R_{El} = R_{nl}(r) = \frac{U_{El}(r)}{r}$$

$$R_{El} = \left[\left(\frac{2}{n a_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{(2n)(n+l)!}\right]^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-\frac{\xi}{2}} \cdot \xi^{l} L_{n-l-1}^{2l+1}(\xi)$$

حيث: $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$

$$\xi = \frac{2r}{na_0}$$

و $L_n^p(x)$ هو كثير حدود Laguerre

• تعريف كثير حدود Laguerre :

من أجل كل ξ وكل عدد عقدي s حيث $|s|<1$ فإن $1 < \alpha$ الدالة التالية تحليلية (analytique)

$$\omega(s,\xi) = (1-s)^{-\alpha-1} e^{-\frac{s\xi}{1-s}}$$
$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} L_\nu^\alpha(\xi)\, s^\nu$$

حيث: $L_\nu^\alpha(\xi)$ هو كثير حدود من الدرجة ν و $\omega(s,\xi)$ تسمى بالدالة المولدة لكثير حدود Laguerre

$$L_\nu^\alpha(\xi) = \sum_{k=0}^{\nu} \frac{\Gamma(\nu+\alpha+1)\,(-\xi)^k}{\Gamma(k+\alpha+1)\,k!\,(\nu-k)!}$$

ولدينا:

$$\int_0^\infty d\xi\, \xi^{\alpha+1} e^{-\xi} L_\nu^\alpha(\xi) L_\nu^\alpha(\xi) = \frac{\Gamma(\nu+\alpha+1)(2\nu+\alpha+1)}{\nu!}$$

عندما $r \to \infty$

$$L_\nu^\alpha(\xi) \underset{\xi\to\infty}{\sim} (-\xi)^\nu$$

إذن:

$$L_{n-l-1}^{2l+1}(\xi) \underset{\xi\to\infty}{\sim} (\xi)^{n-l-1}$$

إذن:

$$R_n(r) \underset{r\to\infty}{\sim} e^{-r/na_0}\, \xi^l (-\xi)^{n-l-1}$$
$$= e^{-r/na_0}\left(\frac{2r}{na_0}\right)^{n-1}$$

فنلاحظ أن التوابع الموجية في المنطقة $r \to \infty$ مستقلة عن l كأنها أصبحت توابع موجية لحالات حيود (Etats de diffusion)

• بعض التوابع الموجية:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

$$\psi_{100} = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}}\, e^{-r/a_0}$$

$$\psi_{200} = \sqrt{\frac{1}{32 a_0^3 \pi}}\left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

$$\psi_{210} = \sqrt{\frac{1}{32 a_0^3 \pi}}\, \frac{r}{a_0}\, e^{-r/2a_0} \cos\theta$$

$$\psi_{21\pm1} = \mp\sqrt{\frac{1}{64\pi a_0^3}}\, \frac{r}{a_0}\, e^{-r/2a_0} \sin\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

• تفسير الانحلال العرضي (dégénérescence accidentelle)

• تمرين:

أدرس الهزاز التوافقي المتجانس في بعد ثلاثي (التوابع الموجية، مستويات الطاقة، الانحلال ...).